

Simulation numérique de la convection thermosolutale non-Boussinesq dans une cavité carrée

Oussama **CHABANI**^a, Stéphane **ABIDE**^b, Nacer **LAMROUS**^a, Belkacem **ZEGHMATI**^b

a Laboratoire de Mécanique, Structures et Energétique (LMSE), Université Mouloud MAMMERI de Tizi-ouzou, Algérie

b Laboratoire de Mathématiques et Physique (LAMPS), Université de Perpignan Via Domitia, France

Résumé :

Dans ce travail, la convection naturelle bidimensionnelle à double diffusion dans une cavité carrée remplie de fluide binaire est étudiée numériquement par un modèle d'écoulement de fluide compressible à faible nombre de Mach. Les parois verticales sont soumises à des conditions aux limites de type Dirichlet en température et fraction massique de soluté tandis que les parois horizontales sont adiabatiques. Les équations de continuité, de conservation de quantité de mouvement et d'énergie ainsi que l'équation de transport des espèces sont résolues par la méthode des différences finies et par un solveur incompressible de type « pressure-based » adapté aux écoulements compressibles. Pour une cavité carrée d'arête $A = 0,1$, un nombre de Lewis $Le = 1$ et un nombre de Prandtl $Pr = 0,71$, nous analysons l'influence des conditions initiales et du rapport des masses molaires des deux constituants du mélange $M = M_2 / M_1$ sur les lignes de courant, les isothermes et les iso-concentration en régime laminaire stationnaire.

Abstract :

Two-dimensional, double diffusion, natural convection in a square enclosure filled with binary fluid is investigated numerically by the low mach number model for compressible fluid. Multiple motions are driven by the external temperature and concentration differences imposed across vertical walls of the enclosure, laminar regime is considered. The transport equations for continuity, momentum, energy and species transfer are discretized in finite differences. The numerical results are reported for the effect of Froude number, and buoyancy ratio of initial temperature and concentration inside the cavity on the iso-contours of stream line, temperature, and concentration in stationary state. This study was done for a length unit $A=0.1$, Lewis number $Le=1$ and Prandtl number $Pr = 0.71$. The mass molar fraction $M=M_2/M_1$ is varied to simulate high dominated thermosolutal convection.

Mots clefs : cavité fermée, faible nombre de Mach, simulation numérique, transfert thermosolutal.

1 Introduction

Au cours de la dernière décennie, de nombreuses études expérimentales et numériques ont été réalisées sur la convection naturelle dans les cavités. La plupart de ces études portent sur la convection naturelle thermique. Néanmoins, la convection naturelle thermosolutale en milieux confinés est omniprésente dans de nombreux domaines de l'ingénierie, de l'océanographie, de l'astrophysique, de la géologie, de la biologie, et des processus chimiques Parmi les travaux effectués sur le transfert thermosolutal en cavité fermée, citons celui de C.Béghein et al [1] sur la convection naturelle thermosolutale en régime laminaire dans une cavité carrée remplie d'air, soumise à des gradients horizontaux de température et de concentration. L'une des finalités de cette étude est l'analyse de l'influence d'une part, des forces de flottabilité, thermique et solutale et d'autre part, de la grandeur relative des nombres de Rayleigh thermique et massique sur le taux de transfert de chaleur et de masse. Cette étude, comme la plupart des travaux numériques sur la convection naturelle, est basée sur l'approximation de Boussinesq (Différence de température ΔT inférieure à 10% de la température de référence), dont la validité, notamment dans le cas des systèmes fermés, reste un sujet de controverses [2,3]. Il faut noter que dans des travaux plus récents consacrés à cette question comme ceux de Paolucci [3] de nouvelles recommandations sur les conditions de sa validité sont proposées.

La modélisation "faible nombre de Mach" a été introduite afin de traiter les écoulements de fluides compressibles, lorsque les vitesses ne sont pas très élevées. Dans cette hypothèse, des simplifications sont apportées au modèle mathématique et conduisent à négliger les travaux des forces de pression et des forces visqueuses dans l'équation de l'énergie, et à considérer comme l'a suggéré Paolucci [3] – que la pression motrice est la somme d'un terme de pression thermodynamique moyenne dans la cavité, reliée à l'équation d'état du fluide, et d'un terme de perturbation de faible amplitude. De cette manière, les effets des ondes acoustiques sont filtrés du champ de l'écoulement.

Le Quéré et al [4,5] ont établi à partir de ce modèle, des solutions de référence pour trois cas test de convection naturelle purement thermique dans une cavité carrée différentiellement chauffée à grand écart de température ; un problème pour lequel l'approximation de Boussinesq n'est plus valide et qui se veut comme une extension de l'étude de De Vahl Davis [6].

Dans le cadre de cette approche, les travaux numériques de V. Heuveline [7] sur la convection naturelle dans une cavité fermée s'intéressent en particulier à l'influence d'un paramètre que l'auteur a défini comme le paramètre « hors Boussinesq ». Les équations de transferts sont résolues en utilisant un schéma à éléments finis (*higher-order mixed finite elements with continuous pressure*). Très récemment, Hua Sun et al [8] ont appliqué le modèle de l'écoulement faiblement compressible au problème du transfert de chaleur et de matière dans les mélanges binaires non-dilués contenus dans une cavité fermée, en tenant compte des vitesses de diffusion sur les parois. Ils se sont intéressés en particulier à l'incidence des paramètres non-Boussinesq thermique ε_T et massique ε_m sur les écarts à l'approximation de Boussinesq en termes des nombres de Nusselt et Sherwood. Ils ont montré en définitive que l'analogie transfert de chaleur - transfert de matière restait applicable dans des domaines de paramètres plus étendus à ceux admis habituellement.

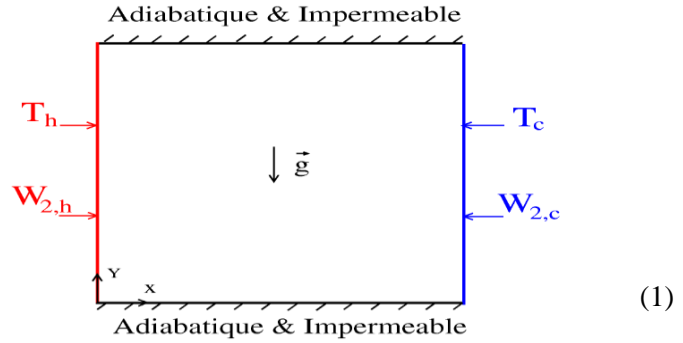
Nous proposons dans le présent travail une étude, similaire au problème traité par ce dernier auteur, sur la convection thermosolutale dans une cavité carrée fermée soumise à des gradients horizontaux de température et de concentration. Les équations de transfert sont résolues par un solveur incompressible de type « pressure-based » adapté aux écoulements compressibles en adoptant un maillage décalé non-uniforme et une approche multi blocs structurés.

2 Formulation et discrétisation

Le problème envisagé est celui de la convection naturelle thermosolutale dans une cavité fermée de section carrée d'arête H , remplie d'un mélange binaire de fluides, caractérisé par le rapport des masses molaires des constituants. Ce mélange est initialement à une température T_0 et la fraction massique du soluté est $W_{2,0}$. Les parois verticales sont soumises à des conditions de type Dirichlet en température et fraction massique de l'espèce '2'. Les parois horizontales sont supposées adiabatiques et imperméables.

Dans notre étude, nous nous sommes limités au cas de l'écoulement laminaire bidimensionnel, sans condensation, sans dissipation visqueuse et en supposant les effets Soret-Dufour négligeables. Les équations régissant le système sont :

Figure1: Schéma du problème physique



Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

Equations de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} = -\frac{\partial p'_m}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} = -\frac{\partial p'_m}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + (\rho - \rho_r) \vec{g} \quad (3)$$

Equation de l'énergie :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} \quad (4)$$

Equation de conservation de l'espèce '2' :

$$\frac{\partial(\rho W_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u W_2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v W_2)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{1,2} \frac{\partial W_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{1,2} \frac{\partial W_2}{\partial y} \right) \quad (5)$$

$$P_m = \bar{P}(t) + p'_m \quad (6)$$

La résolution numérique de ce système d'équations est principalement basée sur des méthodes de résolution adoptées pour les écoulements incompressibles. Les variables de vitesse et de pression sont disposées sur un maillage décalé. Le raffinement du maillage près de la paroi est obtenu à l'aide de transformations analytiques de type hyperbolique [9]. Les flux diffusifs et convectifs sont discrétisés par différences centrées. La discrétisation temporelle repose sur un schéma implicite d'Euler d'ordre 2 pour les termes visqueux et explicite pour les termes convectifs. Le découplage vitesse/pression est assuré par un algorithme de type projection [10]. La deuxième étape consiste à déterminer le champ de vitesse final connaissant le champ de température à l'instant $n + 1$. La procédure de résolution utilisée dans ce travail est basée sur un algorithme de projection modifié pour prendre en compte la divergence non nulle du champ de vitesse final. Cette procédure est détaillée par Knikker [10].

L'ensemble des systèmes linéaires est inversé à l'aide d'un solveur multi grille géométrique de la librairie HYPRE. Une approche multi blocs structurés est adoptée afin de proposer une implémentation parallèle distribuée du présent solveur.

3 Résultats et commentaires

3.1 Validation et sensibilité au maillage

La validation du code numérique est réalisée en comparant nos résultats au benchmark d'une cavité fermée différentiellement chauffée [4,5]. Le nombre de Rayleigh thermique est de 10^6 et le paramètre non-Boussinesq thermique est $\varepsilon_T = 0.6$. Les résultats sont rapportés dans les deux tableaux ci-dessous, en termes de nombre de Nusselt moyen, maximal et minimal le long des parois verticales. Pour cette valeur de ε_T la solution est à peu près symétrique par rapport au plan vertical central, comme le montre la figure 2 ci-dessous et l'écart entre les valeurs du nombre de Nusselt moyen sur les parois chaude et froide est de l'ordre de 0.004%.

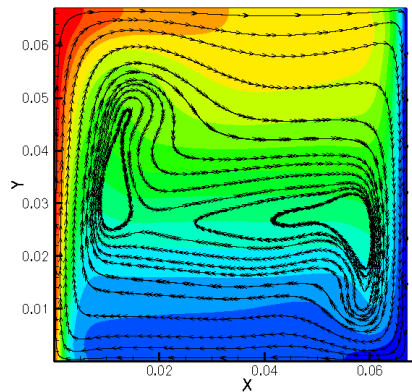


Figure2: Isothermes et lignes de courant pour $\theta_0 = 0$, $A=0.1$, $Ra = 10^6$; $Pr = 0.71$; $\varepsilon_T = 0.6$; $\gamma = 1.4$

L'étude de sensibilité des résultats au maillage a été faite en considérant 4 cas : (80x80), (120x120), (160x160) et (280x280). Les tableaux ci dessous montrent que le code donne des résultats très proches de la solution de référence [11] et qu'un maillage non-uniforme de 160x160 permet d'atteindre une précision de l'ordre de 10^{-4} . C'est ce maillage qui sera utilisé dans cette étude car il réalise un bon compromis en termes de temps de calcul.

Maillage	80*80	120*120	160*160	280*280	Solutions de référence CEA-LIMSI 2000
Nu_{av} (hot/cold)	8.870/8.869	8.863/8.864	8.861/8.862	8.8597/8.8601	8.85978/8.85978
\bar{p}/p_{th}	0.855	0.855	0.855	0.855	0.856338

Tableau1 : Sensibilité au maillage

	Le code	Vierendeels	Beccantini	Studer
Maillage	280*280	2048*2048	296*296	80*80
Nu_{av} (hot/cold)	8.8597/8.8601	8.85978/ 8.85978	8.85990/ 8.86007	8.85980/ 8.85990
Nu_{min} (hot/cold)	1.094/0.871	1.07345/ 0.85512	1.07356/ 0.85542	1.07360/0.85500
Nu_{max} (hot/cold)	19.717/16.417	19.59642/16.3622	19.59538/16.3633	19.59500/16.3610
\bar{p}/p_{th}	0.855	0.856340	0.85634	0.85634

Tableau 2 : Validation du code $Ra = 10^6$; $\varepsilon_T = 0.6$

3.2 Cas du transfert thermique pur

Nous nous sommes intéressés à l'influence des conditions initiales sur les isothermes dans le cas du régime de couche limite, c'est-à-dire pour un nombre de Rayleigh $Ra_T > 10^5$ et pour une valeur modérée du paramètre non-Boussinesq ($\varepsilon_T = 0.3$). La condition $\theta = -0.5$ correspond à l'état où le fluide est initialement à la température de la paroi froide ; lorsque $\theta = 0.5$ le fluide est à la température de la paroi chaude et il est à la température moyenne pour $\theta = 0$.

Dans les trois cas envisagés, Les isothermes présentent un profil identique : l'épaisseur de couche limite augmente le long de la paroi verticale chaude et diminue sur la paroi froide. En dehors du cœur de la cavité, il est à noter une stratification thermique pratiquement horizontale. Dans cette situation, les conditions initiales n'ont pratiquement aucune incidence sur les isothermes à l'état stationnaire.

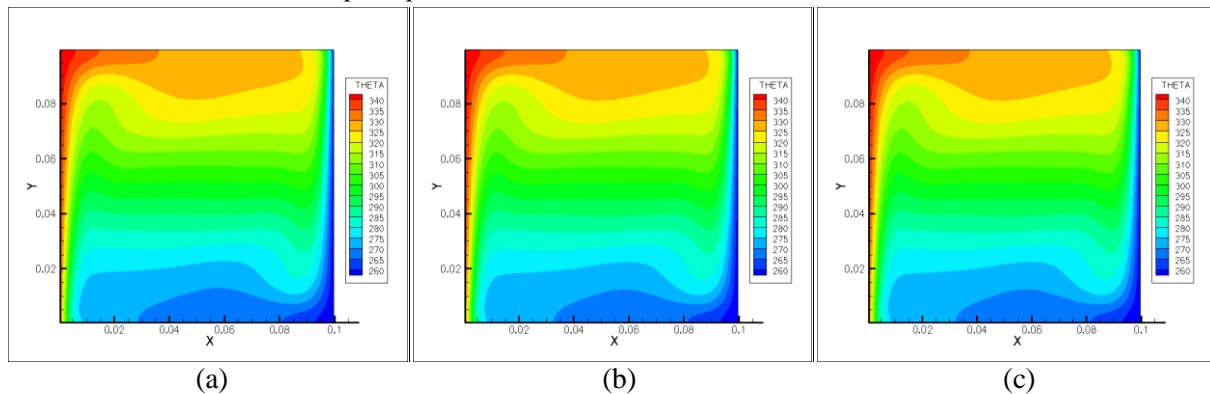


Figure3: Répartition de la température à l'intérieur de la cavité pour $\theta_0 = -0.5, 0, +0.5$ respectivement (a), (b) et (c). ($A=0.1, Fr = 0,4225 \cdot 10^{-6}$; $\sigma = 0,71$; $\varepsilon_T = 0,3$; $\gamma = 1,4$)

3.2 Cas du transfert massique pur

La figure 4 montre l'influence des conditions initiales sur les iso-fraction massique dans le cas d'un mélange moyennement dilué, le coefficient qui mesure l'écart au mélange dilué ε_m est égal à 0.3. La condition $W = -0.5$ correspond à l'état où le fluide est initialement à la concentration de la paroi de basse concentration; lorsque $W = 0.5$ le fluide est au contraire à la concentration initiale la plus élevée et il est à la concentration moyenne pour $W = 0$.

L'influence des conditions initiales est, dans ce cas, plus significative que pour la convection naturelle thermique car la masse totale du mélange binaire n'est plus en quantité constante dans la cavité. Si la fraction massique du soluté est faible au départ, il se produit une augmentation de sa concentration et par conséquent de la masse du mélange, de la pression thermodynamique et des échanges massiques par suite de la diffusion et advection au niveau de la paroi de forte concentration. Inversement si le soluté est à la concentration la plus élevée à l'état initial, la masse et la pression thermodynamique subissent une baisse due à l'aspiration de ce constituant au niveau de la paroi 'pauvre' en soluté.

Dans le cas figuré, le nombre de Schmidt est pris à 0.71 (égal au nombre de Prandtl du cas thermique), et le rapport des masses molaires des deux constituants est inférieur à l'unité (le constituant 2 est plus léger) : les profils des iso-concentrations en constituant '2' sont alors semblables aux isothermes du cas thermique pur. Elles sont de type couche limite mais en raison de la variabilité de la masse du mélange, l'épaisseur de ces couches sera influencée par les conditions initiales du mélange comme le montre la figure 4.

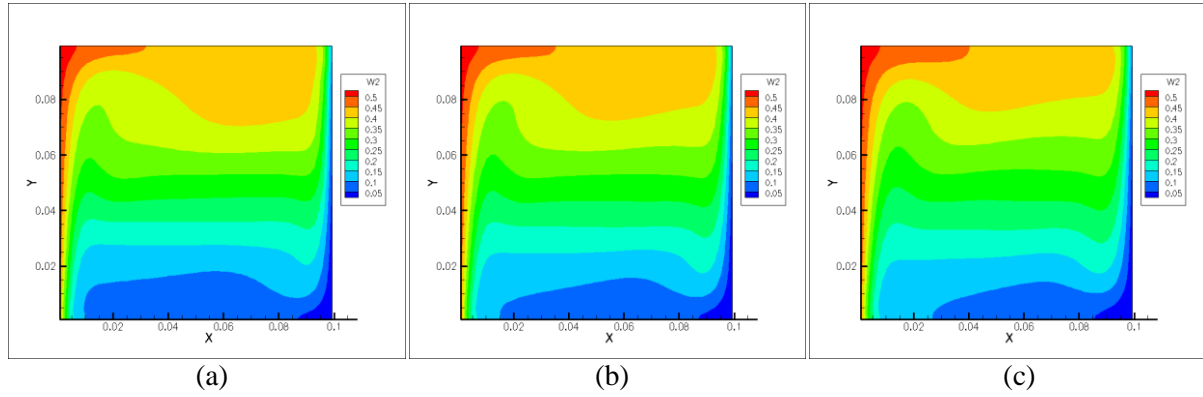


Fig 4: Répartition de la fraction massique à l'intérieur de la cavité pour $W_0 = -0.5, 0$ et $+0.5$ respectivement (a), (b) et (c), ($A=0.1$; $Fr = 0,4225 \cdot 10^{-6}$, $Sc = 0,71$; $\varepsilon_m = 0,3$; $C_W = 1,387$ ou $M^* = 0,6$; $W_{2,h} = 0,53$ et $W_{2,c} = 0,0$)

3.3 Cas du transfert thermosolutal

Les figures 5 et 6 représentent dans trois cas différents de conditions initiales, les isothermes et iso-fractions massiques en convection thermosolutale, obtenues lorsque les forces thermiques et massiques sont opposées, ($Le = 1$; $\varepsilon_T = 0,2$; $\varepsilon_m = -0,2$ et $C_W = 3,6322$) et lorsqu'un soluté plus lourd que le solvant diffuse dans la cavité ($M^* = 4$).

Les résultats montrent que la convection massique qui s'effectue en sens contraire des aiguilles d'une montre (opposite flow) domine la convection thermique dans la partie basse de la cavité en y entraînant le fluide chaud comme observé dans la figure 4. La figure 5 montre que cette partie de la cavité est la zone de grande concentration en espèce 2.

Dans la zone supérieure de la cavité la température et la masse volumique du fluide sont pratiquement constantes en dehors des couches limites. Les phénomènes thermiques et massiques se neutralisent.

Les conditions initiales ont très peu d'incidence sur la structure de l'écoulement, du moins pour le cas étudié. Par ailleurs, ces phénomènes ne sont pas prévus par la formulation Boussinesq de ce problème [1] qui prédit dans ce cas la neutralisation des effets thermiques et massiques et l'établissement d'un régime de diffusion. La différence de ces approches est liée à l'advection de l'espèce 2 au niveau des parois, non prise en compte dans l'hypothèse de Boussinesq.

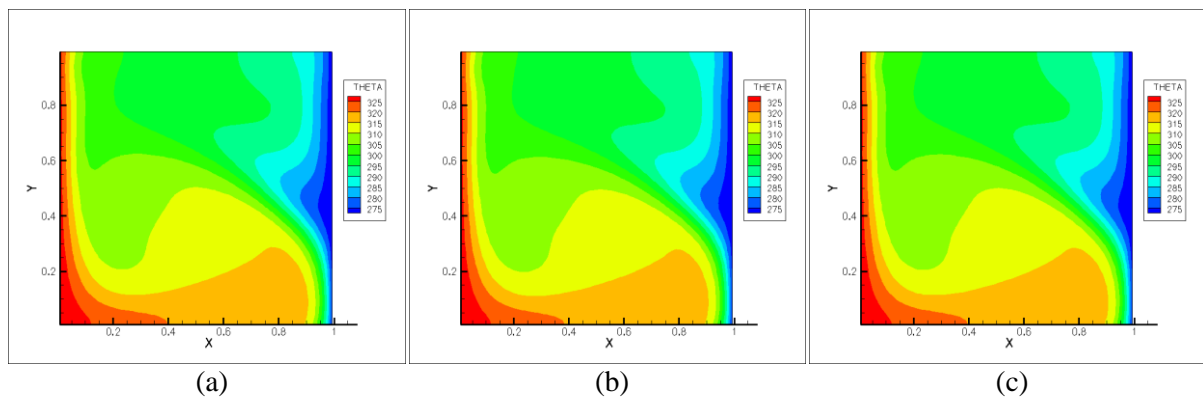


Fig 5: Isothermes pour les conditions initiales ($\theta_0 = W_0 = -0.5; 0$ et $+0.5$) respectivement (a), (b) et (c). ($A=0,1$; $Le=1$; $Fr = 10^{-7}$; $Sc = 0,71$; $\varepsilon_T = 0,2$; $\varepsilon_m = -0,2$; $C_W = 3,6322$ ou $M^* = 4$; $W_{2,h} = 0,242$ et $W_{2,c} = 0,0$)

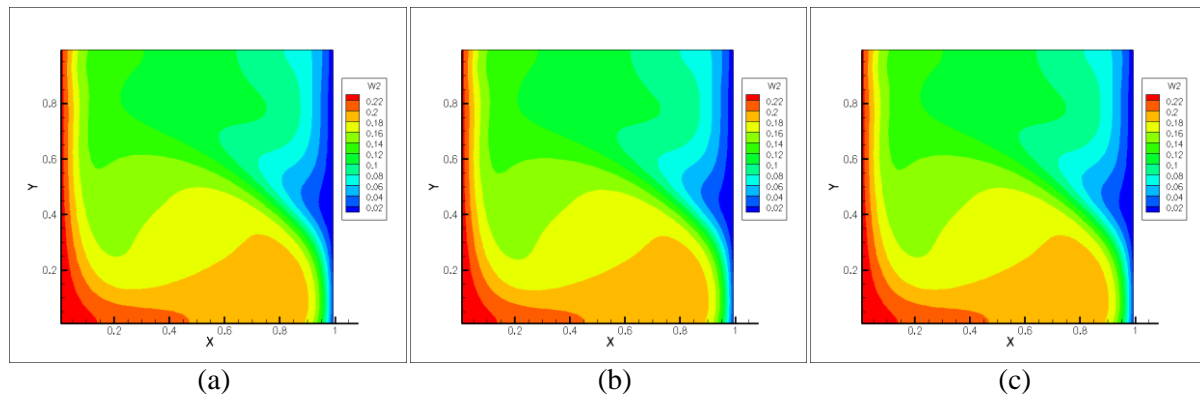


Fig 6 : Iso fraction massique pour les conditions initiales ($\theta_0 = W_0 = -0,5$; 0 et $+0,5$) respectivement (a), (b) et (c). ($A=0,1$; $Le=1$; $Fr = 10^{-7}$; $Sc = 0,71$; $\varepsilon_T = 0,2$; $\varepsilon_m = -0,2$; $C_W = 3,6322$ ou $M^* = 4$; $W_{2,h} = 0,242$ et $W_{2,c} = 0,0$)

4 Conclusion

Le problème de la convection double diffusive d'un mélange binaire à l'intérieur d'une cavité verticale soumise à de gradients de températures et de concentration imposés sur les parois est étudié numériquement.

La méthode des différences finies est utilisée pour la résolution du problème, les comparaisons avec les travaux publiés sur le cas de problème similaire ont permis la validation de notre code de calcul.

Les résultats des simulations sont représentés sous forme d'isothermes pour la convection thermique pure et iso-fractions massique pour la convection massique pure. Pour le transfert thermosolutal nous avons simulé un cas où les deux effets sont opposés et dans lequel le transfert massique l'emporte en raison du choix d'une espèce diffusante plus lourde que le solvant.

Nous avons montré que les conditions initiales ont beaucoup plus d'incidence dans le cas du transfert massique.

Références

- [1] C. Beghein, F. Haghighat, F. Allard, Numerical study of double-diffusive natural convection in a square cavity, *Int J Heat and Mass Transfer* 35 (1992) 833-846
- [2] D.D. Gray, A. Giorgini, The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases, *Int J Heat and Mass Transfer* 19 (1976) 545-551.
- [3] S. Paolucci, On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations, Technical report, Sandia National Laboratory, (1982). SAND82-8257.
- [4] P. Le Quéré, C. Weisman, H. Paillère, J. Vierendeels, E. Dick, R. Becker, M. Braack, J. Locke, Modelling of natural convection flows with large temperature differences: a benchmark problem for low mach number solvers. part 1. Reference solutions, *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, (2005), (ESAIM) vol 39, 609-616.
- [5] P. Le Quéré, C. Weisman, H. Paillère, J. Vierendeels, E. Dick, R. Becker, M. Braack, J. Locke, Modelling of natural convection flows with large temperature differences: a benchmark problem for low mach number solvers. part 2. contributions to the june 2004 conference, *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, (2005) (ESAIM) vol 39, 617-621.
- [6] J. Vierendeels, B. Merci, E. Dick, Numerical study of natural convective heat transfer with large temperature differences, *Int. J. Numerical Methods for Heat and Fluid Flows* 11(4) (2001) 329-341.
- [7] V. Heuveline, On higher-order mixed FEM for low Mach number flows: application to a natural convection benchmark problem, *Int. J. Numer. Meth. Fluid* 41 (2003) 1339-1356
- [8] H. Sun, G. Lauriat, On the heat and mass transfer analogy for natural convection of non-dilute binary mixtures of ideal gases in cavities, *C. R. Mécanique* 337 (2009) 141-149.

- [9] M.Vinokur, On one-dimensional mesh transform for finite differences calculations, *NASA contractor report*, (1989).
- [10] R.Knikker, A comparative study of high-order variable-property segregated algorithms for unsteady low Mach number flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (2011) 403-427.
- [11] H.Paillère, P.Le Quéré, Modelling and simulation of natural convection flows with large temperature differences: a benchmark problem for low Mach number solvers, 12th séminaire de Mécanique des Fluides Numériques, CEA Saclay, France, 25-26 Jan. 2000.